

# 提高水分子流出纳米碳管速度的 特殊水分子偶极排布研究<sup>\*</sup>

亓文鹏<sup>1,3</sup>, 涂育松<sup>2</sup>, 万荣正<sup>3</sup>, 方海平<sup>1,3</sup>

- (1. 山东大学 物理学院, 济南 250100;  
2. 上海大学 系统生物学研究所, 上海 200444;  
3. 中国科学院 上海应用物理研究所, 上海 201800)

(戴世强推荐)

**摘要:** 使用分子动力学的方法, 研究了水分子进出狭窄碳纳米管的过程. 发现管口处水分子的偶极垂直于碳管时容易流出碳管. 根据碳管中与之相邻的水分子的偶极方向可以把这种特殊构型分为 2 类. 虽然, 这 2 类特殊结构的出现概率非常小, 但是它们对净流过碳管水分子的贡献与其它结构的贡献基本相同. 这 2 种偶极排布中水分子比较接近管壁、远离 Lennard-Jones 势的平衡位置, 导致这 2 种偶极排布中水分子能量升高, 处于相对不稳定的状态, 容易流出碳管. 这个发现表明可以通过调控碳纳米管内的水分偶极方向控制管内的水分子流动.

**关键词:** 水; 纳米碳管; 单行水链; Lennard-Jones 势

**中图分类号:** O352      **文献标志码:** A

**DOI:** 10.3879/j.issn.1000-0887.2011.09.002

## 引 言

水分子可以进入纳米碳管<sup>[1-5]</sup>和生物水通道蛋白的发现<sup>[6-7]</sup>, 大大促进了纳米尺度管道中水流动特性的研究<sup>[8-19]</sup>. 例如, 热梯度引起的纳米碳管中的质量转移<sup>[20]</sup>, 使用 Navier-Stokes 方程研究纳米通道中水分子的平动自由度与转动自由度之间的偶合<sup>[21]</sup>等等. 在研究中发现, 具有合适内径的纳米管道中, 水分子以一维链的形式存在<sup>[12,22]</sup>, 并且这些水分子的偶极基本上平行于管轴. 在一维水链的情况下, Wan 等人发现纳米管道中水分子自发的沿一维水链的偶极方向流动<sup>[23]</sup>. Gong 等人发现在单壁纳米碳管附近引入水通道蛋白中的电荷分布能够使碳管中水分子发生单向流<sup>[24]</sup>. 在 Gong 的系统中, 纳米碳管中的水分子偶极排布受到了外部电荷的影响. 但是, 水分子在纳米碳管中的流动性质和由电荷导致的水分子偶极朝向之间的关系还没有研究清楚.

本文使用分子动力学方法研究了水分子进出狭窄纳米碳管的过程, 发现当管口处的水分

\* 收稿日期: 2011-04-29; 修订日期: 2011-05-24

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(10825520); 上海市教委科研创新资助项目(11YZ20)

作者简介: 亓文鹏(1981—), 男, 济南人, 博士生(E-mail: qi-wenpeng@mail.sdu.edu.cn);  
方海平(1965—), 男, 浙江人, 教授, 博士, 博士生导师(联系人. Tel: +86-21-59554785;  
Fax: +86-21-39192394; E-mail: fanghaiping@sinap.ac.cn).

子偶极垂直于碳管轴时,水分子容易流出碳管.这种水分子的特殊结构减弱了水分子和纳米碳管之间的 Lennard-Jones(LJ)吸引势.因为 LJ 吸引势能够补偿一部分水从体相进入碳管中带来的能量损失.这种特殊的结构可以分为 2 类:第 1 类结构中管内紧邻水分子的偶极指向管外, LJ 吸引势减弱了 10.0 kJ/mol;第 2 类结构中管内紧邻水分子的偶极指向管内, LJ 吸引势减弱了 4.0 kJ/mol.造成这种区别的原因是第 1 类结构中两水分子之间的氢键伸长,而第 2 种构型中两水分子之间的氢键保持不变,只是氢键的方向发生了变化.虽然,这两类特殊结构的出现概率非常小,但是它们对净流过碳管水分子数目的贡献与主要的偶极排布带来的贡献非常接近.这个发现给出了水分子流出纳米碳管时的基本图像,表明如果控制好管内水分子的偶极排布就能控制管内的水流.这个结果对海水净化,污水处理和新的纳米器件的制造具有非常重大的意义!

### 1 系统构建和模拟方法

将一只两端开口,长度为 1.34 nm,直径为 0.81 nm 的 armchair 型(6,6)单壁纳米碳管放入体积为 4.50 nm×4.50 nm×4.50 nm 的水盒子中,进行分子动力学模拟.模拟条件为等压(1bar=10<sup>5</sup> Pa)等温(300 K),分别使用 Parrinello-Rahman 压强耦合方法<sup>[25]</sup>和 Nose-Hoover 温度耦合方法<sup>[26-27]</sup>.模拟软件使用 GROMACS 4.0<sup>[28]</sup>,模拟中使用 TIP3P 水模型<sup>[29]</sup>.步长为 1 fs,每 0.25 s 收集一帧数据.使用不带电的 LJ 粒子模拟碳原子,其中  $\delta_{CC} = 0.34$  nm,  $\delta_{CO} = 0.33$  nm,势阱深度  $\epsilon_{CC} = 0.36$  kJ/mol,  $\epsilon_{CO} = 0.48$  kJ/mol.模拟中碳碳键长度为 0.14 nm,键常数为 39 396 0 kJ·mol<sup>-1</sup>·nm<sup>-2</sup>,3 个碳原子之间的夹角为 120°,维持键角的常数为 527 kJ·mol<sup>-1</sup>·K<sup>-2</sup>,并且碳原子之间还有一个很弱的二面角势<sup>[2]</sup>.整个模拟进行了 300 ns,其中后 295 ns 的数据用来分析.

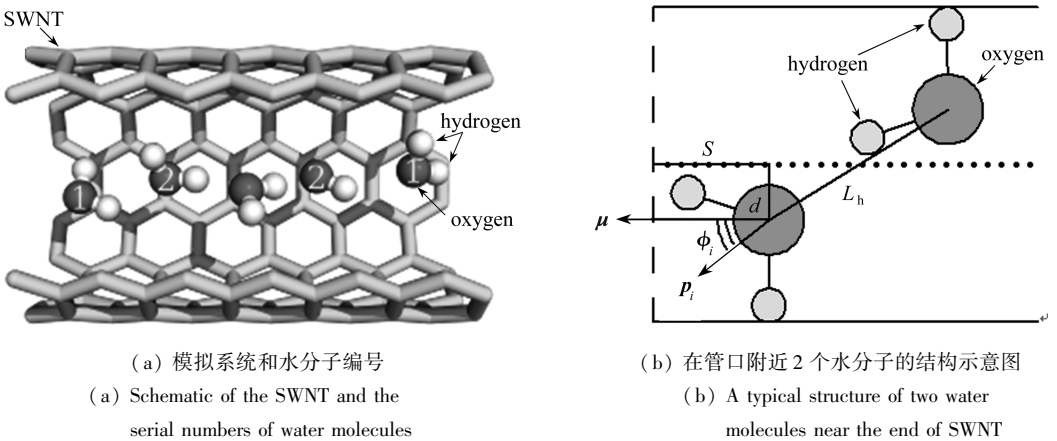


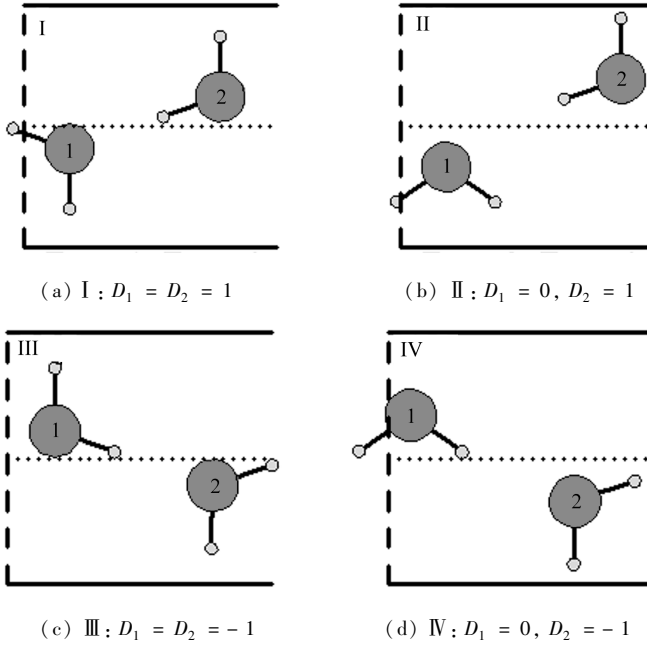
图 1 模拟系统示意图

Fig. 1 Schematic of the SWNT

为了便于描述,文中将管口处的水分子计为 1 号水分子,管内与 1 号相邻的水分子记为 2 号水分子,如图 1(a)所示.为了定量的描述碳管中水分子的偶极方向,定义第  $i$  个水分子与一个单位矢量的夹角  $\phi_i$ ,计算方法为<sup>[17]</sup>

$$\phi_i = \arccos(\mathbf{p}_i \cdot \boldsymbol{\mu} / |\mathbf{p}_i|),$$

$\boldsymbol{\mu}$  是一个单位矢量,它的方向沿着管轴指向管外. $\mathbf{p}_i$  是第  $i$  个水分子的偶极矢量,如图 1(b)所示.定义水分子的偶极方向  $D_i$ ,当  $0^\circ \leq \phi_i < 65^\circ$  时,  $D_i = 1$ ;当  $65^\circ \leq \phi_i \leq 115^\circ$  时,  $D_i = 0$ ;当  $115^\circ < \phi_i \leq 180^\circ$  时,  $D_i = -1$ .在图 2 中,我们给出了  $D_1 D_2$  的 4 种偶极排布状态.

图2 4种不同的 $D_1, D_2$ 状态下水分子的结构示意图Fig. 2 Schematic diagram of the water molecule structures in four states of different  $D_1$  and  $D_2$ 

注 图1(a)中的短棍代表单壁纳米碳管,图中一部分碳原子显示为透明或没有画出;管外的水分子没有画出.图1(b)在管口附近两个水分子的结构示意图.图中竖直虚线代表纳米碳管管口平面,两条水平实线代表纳米碳管管壁,水平点线代表纳米碳管中轴, $\mu$ 代表方向沿管轴指向管外的单位矢量, $p_i$ 代表水分子的偶极矢量. $\phi_i$ 为 $\mu$ 和 $p_i$ 的夹角.

对于每一帧数据,可以确定1号和2号两个水分子的偶极方向.通过比较连续两帧之间处于管内水分子的序号,可以确定水分子进出管子的数目.

## 2 结果和讨论

表1给出了不同水分子偶极排布的出现概率( $\rho$ ),平均每ns进入( $N_{in}$ )和流出( $N_{out}$ )管口的水分子个数,不同水分子偶极排布的平均通量( $F$ )和单位之间内(1 ns)不同水分子偶极排布引起的净流过管子的水分子数目( $F \cdot \rho$ ).通量 $F$ 定义为单位时间内水分子流出管口与进入管口的水分子数目之差( $F = N_{out} - N_{in}$ ).

表1 不同的水分子偶极排布情况下 $\rho, N_{out}, N_{in}, F$ 和单位间内净流过管子的水分子数目( $F \cdot \rho$ )Table1  $\rho, N_{out}, N_{in}, F$  and the net number of water molecules flow through the nanotube end ( $F \cdot \rho$ ) in water dipole each state

$D_1$	$D_2$	$\rho$	$N_{out} / (\text{个/ns})$	$N_{in} / (\text{个/ns})$	$F$	$F \cdot \rho$
1	1	0.488	487.8	500.6	-12.8	-6.2
0	1	0.009	1 178.4	172.0	1 006.4	9.0
-1	-1	0.495	503.1	522.1	-19	-9.4
0	-1	0.004	1 550.8	169.5	1 381.3	5.6

在模拟中有4种水分子偶极排布状态, $D_1 = D_2 = 1; D_1 = 0, D_2 = 1; D_1 = D_2 = -1$ 和 $D_1 = 0; D_2 = -1$ 分别用I, II, III和IV表示(如图2所示).I状态出现的概率 $\rho_1$ 等于0.490,其它状态

的出现概率： $\rho_{II}$  为 0.009,  $\rho_{III}$  为 0.497,  $\rho_{IV}$  为 0.004。相对于主要状态 I 和 III, 状态 II 和 IV 的出现概率非常小。但是, 状态 II 和 IV 的平均通量  $F_{II}$  和  $F_{IV}$ , 为  $1\,001.4\text{ ns}^{-1}$  和  $1\,395.7\text{ ns}^{-1}$  (正通量值表示水分子流出碳管)。这两个通量的值远大于状态 I 和状态 III 的通量 ( $F_I = -12.6\text{ ns}^{-1}$ ,  $F_{III} = -19\text{ ns}^{-1}$ )。所以, 单位时间内 II、IV 状态净流过碳管的水分子数 ( $F_{II} \cdot \rho_{II} = 9.0\text{ ns}^{-1}$ ,  $F_{IV} \cdot \rho_{IV} = 5.6\text{ ns}^{-1}$ ) 大致等于 I、III 状态净流过碳管的水分子数 ( $F_I \cdot \rho_I = -6.2\text{ ns}^{-1}$ ,  $F_{III} \cdot \rho_{III} = -9.4\text{ ns}^{-1}$ )。  $D_1, D_2$  还有其它的组合, 但是这些组合出现的概率都非常小而且对于通量的贡献也非常小(见附录表 A1)。

为了理解水分子在状态 II、IV 下容易流出管子的现象, 及其背后的物理图像。我们计算了 1 号水分子和碳管之间的平均 LJ 相互作用势  $P_{LJ}$ , 1 号水分子和 2 号水分子之间的平均电相互作用势  $E_{ww}$ , 1 号水分子离开单壁纳米碳管的平均距离  $d$ , 1 号水分子与 2 号水分子之间的平均氢键长度  $L_h$ , 以及 1 号水分子到最近碳管口的平均距离  $S$ 。所有的结果在表 2 中给出。

表 2 在不同的水分子偶极排布情况下,  $P_{LJ}, E_{ww}, d, L_h$  以及  $S$  的值

Table 2  $P_{LJ}, E_{ww}, d, L_h$  and  $S$  in different water dipole states

$D_1$	$D_2$	$E_{ww} / (\text{kJ/mol})$	$L_h / \text{nm}$	$d / \text{nm}$	$P_{LJ} / (\text{kJ/mol})$	$S / \text{nm}$
1	1	-27.40	0.282	0.062	-36.66	0.139
0	1	-23.61	0.289	0.065	-26.27	0.103
-1	-1	-27.64	0.281	0.062	-34.60	0.133
0	-1	-27.94	0.282	0.063	-30.48	0.089

从表 2 中我们可以看出, 势能  $P_{LJ}, E_{ww}$  和长度  $d, L_h$  在主要状态  $D_1 = D_2 = \pm 1$  中的数值基本一致。相对于状态 I, 状态 II 中 1 号水分子的氢原子距离 2 号水分子的氢原子更近, 如图 2(a) 和图 2(b) 所示。因此, 状态 II 中水分子的电相互作用势  $E_{ww}$  比状态 I 中高了  $4\text{ kJ/mol}$ , 水分子之间的氢键长度  $L_h$  长了  $0.007\text{ nm}$ 。氢键长度  $L_h$  的伸长, 引起水分子远离管轴。所以, 相对于状态 I, 状态 II 中 1 号水分子到碳管轴的距离  $d$  增加了  $0.002\text{ nm}$ , 水分子与碳管之间的 LJ 相互作用势  $P_{LJ}$  高了  $10.0\text{ kJ/mol}$ 。

同样的, 比较状态 III 和 IV, 发现水分子之间的电相互作用势  $E_{ww}$  和水分子之间的氢键长度  $L_h$  保持不变, 但是 1 号水分子到管轴的距离  $d$  在状态 IV 中增加了  $0.001\text{ nm}$ 。从图 2(c) 和图 2(d) 可以看出, 距离  $d$  的变化来自两种状态中 1 号 2 号水分子之间氢键方向的变化。因此, 相对于状态 III, 状态 IV 中 1 号水分子与碳管的 LJ 势  $P_{LJ}$  高了  $4.0\text{ kJ/mol}$ 。

当水分子从体相水进入纳米碳管中, 大约要失去 2 个氢键。水分子与纳米碳管之间的 LJ 吸引势可以补偿部分的能量损失。Hummer 等人发现当减小水分子与碳管 LJ 作用的势阱深度时, 水分子会被排出纳米碳管<sup>[2]</sup>。所以, 状态 II、IV 中水分子与碳管之间 LJ 势 ( $P_{LJ}$ ) 升高造成了水分子处于相对不稳定的状态, 容易流出碳管。而处于状态 IV 的水分子比处于状态 II 的水分子距离管口更近(具有更小的  $S$ ), 所以前一种状态中水分子更容易流出纳米碳管。

狭窄碳管中的水分子由氢键首尾相连, 而且这些氢键基本是沿管轴方向排列的, 所以水分子的偶极基本上平行于管轴。因此, 水分子很容易绕他们之间的氢键转动, 但是很难将偶极转动到垂直于管轴的方向。1 号水分子的偶极方向  $D_1$  趋近于 0 的前提条件是 1 号水分子同管外的水分子形成氢键, 而且 1 号水分子必须作为供体(贡献出自己的氢原子形成氢键)。然而, 水分子是三角形的 ( $\angle HOH = 109.5^\circ$ ), 所以在状态 II ( $D_1 = 0, D_2 = 1$ ) 中,  $D_1 = 0$  使得 1 号水分子与 2 号水分子之间的氢键伸长; 在状态 IV ( $D_1 = 0, D_2 = -1$ ) 中,  $D_1 = 0$  使得 1 号水分子与 2 号水分子之间的氢键改变方向。导致了两种情况下, 势能  $E_{ww}, P_{LJ}$  和距离  $d, L_h$  具有不同的数值。

图 2 只是示意图, 不能完全的描述实际的复杂情况, 只能帮助我们理解 2 种构型产生不同

能量变化的原因是在于两种情况下氢键长度  $L_h$  不同。

### 3 总 结

在研究水分子进出单壁纳米碳管的过程中发现,当位于管口处的水分子(1号)偶极垂直于碳管时容易流出碳管.这种状态包含两类结构,这两类结构都能够降低水分子与碳管间的 Lennard-Jones 吸引势.在第1种结构中,管内紧邻的水分子(2号)偶极指向管外,1号水分子的偶极方向使得1号和2号2个水分子中氢原子相互靠近,引起2个水分子之间的氢键长度增加,进而两个水分子都向碳管管壁移动、远离 LJ 势的平衡位置;在第2种构型中,2号水分子偶极指向管内,1号水分子偶极方向引起1号和2号水分子之间的氢键方向改变,进而2个水分子都向碳管管壁移动、远离 LJ 势的平衡位置.2种结构中水分子的能量都升高(第1种结构更明显),处于相对不稳定的状态,容易流出管子.虽然,这两类特殊结构的出现概率非常小,但是它们对净流过碳管水分子的贡献与主要的偶极排布带来的贡献非常接近. Gong 等人在水分子单向流过纳米碳管的研究中也发现了特殊的偶极排布<sup>[24]</sup>.他们发现的特殊偶极排布形式也许可以控制碳管内的水流方向.而且,水分子的特殊偶极排布可以帮助操纵碳管内的生物分子<sup>[29]</sup>,还可以形成疏水的单层水膜<sup>[30]</sup>.本文给出了水分子进出碳管的基本图像并且表明可以通过影响碳管内一维水链的偶极排布来控制管内水的流动.

**致谢** 我们非常感谢陆杭军博士和左光宏博士对本工作的有益建议和积极讨论.

### 附 录

表 A1 不同水分子偶极排布的  $\rho, N_{out}, N_{in}, F$  和单位之内净流过管子水分子数目 ( $F \cdot \rho$ )

Table A1  $\rho, N_{out}, N_{in}, F$  and the net number of water molecules flow through the nanotube end ( $F \cdot \rho$ ) in each state

$D_1$	$D_2$	$\rho$	$N_{out} / (\text{个/ns})$	$N_{in} / (\text{个/ns})$	$F$	$F \cdot \rho$
1	1	0.487 6	487.8	500.6	-12.8	-6.2
1	0	0.001 9	604.8	437.1	167.7	0.3
1	-1	0.000 0	0	0	0	0
0	1	0.009 3	1 178.4	172.8	1 006.4	9.4
0	0	0.000 3	892.7	192.1	700.6	0.2
0	-1	0.004 0	1 550.8	169.5	1 381.3	5.6
-1	1	0.000 2	576.3	457.6	118.7	0.0
-1	0	0.002 0	555.9	420.3	135.6	0.3
-1	-1	0.494 8	503.1	522.1	-19	-9.4

### 参考文献:

- [1] Pan Z W, Xie S S, Chang B H, Wang C Y, Lu L, Liu W, Zhou M Y, Li W Z. Very long carbon nanotubes[J]. *Nature*, 1998, **394**(6694): 631-632.
- [2] Hummer G, Rasaiah J C, Noworyta J P. Water conduction through the hydrophobic channel of a carbon nanotube[J]. *Nature*, 2001, **414**(6860): 188-190.
- [3] Cambre S, Schoeters B, Luyckx S, Goovaerts E, Wenseleers W. Experimental observation of single-file water filling of thin single-wall carbon nanotubes down to chiral index (5,3)[J]. *Physical Review Letters*, 2010, **104**(20): 207401.
- [4] Fang H P, Wan R Z, Gong X J, Lu H J, Li S Y. Dynamics of single-file water chains inside nanoscale channels: physics, biological significance and applications[J]. *Journal of Physics*



- D—Applied Physics*, 2008, **41**(10): 16.
- [5] Wan R Z, Fang H P. Water transportation across narrow channel of nanometer dimension [J]. *Solid State Communications*, 2010, **150**(21/22): 968-975.
- [6] de Groot B L, Grubmuller H. Water permeation across biological membranes: mechanism and dynamics of aquaporin-1 and GlpF[J]. *Science*, 2001, **294**(5550): 2353-2357.
- [7] Tajkhorshid E, Nollert P, Jensen M O, Miercke L J W, O'Connell J, Stroud R M, Schulten K. Control of the selectivity of the aquaporin water channel family by global orientational tuning[J]. *Science*, 2002, **296**(5567): 525-530.
- [8] Wan R Z, Li J Y, Lu H J, Fang H P. Controllable water channel gating of nanometer dimensions[J]. *Journal of the American Chemical Society*, 2005, **127**(19): 7166-7170.
- [9] Rasaiah J C, Garde S, Hummer G. Water in nonpolar confinement: from nanotubes to proteins and beyond[J]. *Annual Review of Physical Chemistry*, 2008, **59**: 713-740.
- [10] Koga K, Gao G T, Tanaka H, Zeng X C. Formation of ordered ice nanotubes inside carbon nanotubes[J]. *Nature*, 2001, **412**(6849): 802-805.
- [11] Allen R, Melchionna S, Hansen J P. Intermittent permeation of cylindrical nanopores by water[J]. *Physical Review Letters*, 2002, **89**(17): 175502.
- [12] Berezhkovskii A, Hummer G. Single-file transport of water molecules through a carbon nanotube[J]. *Physical Review Letters*, 2002, **89**(6): 064503.
- [13] Beckstein O, Sansom M S P. Liquid-vapor oscillations of water in hydrophobic nanopores [J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 2003, **100**(12): 7063-7068.
- [14] Jensen M O, Tajkhorshid E, Schulten K. Electrostatic tuning of permeation and selectivity in aquaporin water channels[J]. *Biophysical Journal*, 2003, **85**(5): 2884-2899.
- [15] Zhu F Q, Tajkhorshid E, Schulten K. Pressure-induced water transport in membrane channels studied by molecular dynamics[J]. *Biophysical Journal*, 2002, **83**(1): 154-160.
- [16] Majumder M, Chopra N, Andrews R, Hinds B J. Nanoscale hydrodynamics—enhanced flow in carbon nanotubes[J]. *Nature*, 2005, **438**(7064): 44.
- [17] Li J Y, Gong X J, Lu H J, Li D, Fang H P, Zhou R H. Electrostatic gating of a nanometer water channel[J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 2007, **104**(10): 3687-3692.
- [18] Joseph S, Aluru N R. Why are carbon nanotubes fast transporters of water? [J]. *Nano Letters*, 2008, **8**(2): 452-458.
- [19] Tu Y S, Xiu P, Wan R Z, Hu J, Zhou R H, Fang H P. Water-mediated signal multiplication with Y-shaped carbon nanotubes[J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 2009, **106**(43): 18120-18124.
- [20] Zhao J O, Huang J Q, Wei F, Zhu J. Mass transportation mechanism in electric-biased carbon nanotubes[J]. *Nano Letters*, 2010, **10**(11): 4309-4315.
- [21] Bonthuis D J, Horinek D, Bocquet L, Netz R R. Electrohydraulic power conversion in planar nanochannels[J]. *Physical Review Letters*, 2009, **103**(14): 144503.
- [22] Waghe A, Rasaiah J C, Hummer G. Filling and emptying kinetics of carbon nanotubes in water[J]. *Journal of Chemical Physics*, 2002, **117**(23): 10789-10795.
- [23] Wan R Z, Lu H J, Li J Y, Bao J D, Hu J, Fang H P. Concerted orientation induced unidirectional water transport through nanochannels [J]. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2009, **11**(42): 9898-9902.
- [24] Gong X J, Li J Y, Lu H J, Wan R Z, Li J C, Hu J, Fang H P. A charge-driven molecular wa-

- ter pump[J]. *Nature Nanotechnology*, 2007, **2**(11): 709-712.
- [25] Parrinello M, Rahman A. Polymorphic transitions in single-crystals: a new molecular-dynamics method[J]. *Journal of Applied Physics*, 1981, **52**(12): 7182-7190.
- [26] Nose S. A unified formulation of the constant temperature molecular-dynamics methods[J]. *Journal of Chemical Physics*, 1984, **81**(1): 511-519.
- [27] Hoover W G. Canonical dynamics: equilibrium phase-space distributions[J]. *Physical Review A*, 1985, **31**(3): 1695-1697.
- [28] Hess B, Kutzner C, van der Spoel D, Lindahl E. GROMACS 4: algorithms for highly efficient, load-balanced, and scalable molecular simulation[J]. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 2008, **4**(3): 435-447.
- [29] Jorgensen W L, Chandrasekhar J, Madura J D, Impey R W, Klein M L. Comparison of simple potential functions for simulating liquid water[J]. *Journal of Chemical Physics*, 1983, **79**(2): 926-935.
- [30] Xiu P, Zhou B, Qi W P, Lu H J, Tu Y S, Fang H P. Manipulating biomolecules with aqueous liquids confined within single-walled nanotubes[J]. *Journal of the American Chemical Society*, 2009, **131**(8): 2840-2845.
- [31] Wang C L, Lu H J, Wang Z G, Xiu P, Zhou B, Zuo G H, Wan R Z, Hu J, Fang H P. Stable liquid water droplet on a water monolayer formed at room temperature on ionic model substrates[J]. *Physical Review Letters*, 2009, **103**(13): 4.

## Water Molecules Exiting a Carbon Nanotube Driven by Special Water Dipole Orientations

QI Wen-peng<sup>1,3</sup>, TU Yu-song<sup>2</sup>, WAN Rong-zheng<sup>3</sup>, FANG Hai-ping<sup>1,3</sup>

(1. Department of Physics, Shandong University, Jinan 250100, P. R. China;

2. Institute of Systems Biology, Shanghai University, Shanghai 200444, P. R. China;

3. Shanghai Institute of Applied Physics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201800, P. R. China;)

**Abstract:** One-dimensional ordered water molecules entering and exiting a carbon nanotube with appropriate radius were studied by molecular dynamics simulations. It was found that a water molecule near the nanotube end was more likely to be expelled from the nanotube if its dipole was almost aligned perpendicular to the nanotube axis. The key to this observation is that those water molecules are closer to the wall of nanotube away from the equilibrium position of Lennar-Jones potential, so that the interaction energy for those water molecules is relatively high. There are two particular structures of the perpendicular water depending on the dipole direction of the adjacent water molecule in the nanotube. Although the probabilities of these structures are quite small, their contributions to the net flux across the nanotube end are approximately equal to the predominant structures. The findings show the possibility of controlling the water flow by regulating the dipole directions of water molecules inside the nanochannels.

**Key words:** water; carbon nanotube; single-file water chain; Lennard-Jones (LJ) interaction